

Title	電極触媒の電子状態解析
Author(s)	宮崎, 晃平
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2018), 2017: 40-40
Issue Date	2018-03
URL	http://hdl.handle.net/2433/230740
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

平成 29 年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

電極触媒の電子状態解析
Electronic Structures of Electrocatalysts

京都大学大学院工学研究科物質エネルギー化学専攻 工業電気化学分野 宮崎 晃平

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、次世代の電気化学エネルギーデバイスであるアルカリ形燃料電池および金属-空気二次電池で用いられる酸素電極触媒の電子状態解析を行った。

特にペロブスカイト型酸化物を中心に、酸化物イオン以外のハロゲンなどのアニオンが混合した複合アニオン化合物に関する電子状態計算を行った。その結果、複合化によって酸素の電子状態が変調を受け、結果として触媒活性が向上することが明らかになった。また、酸素欠損の生成エネルギーについても、理論的説明を得ることができた。